



TITLE:

# 多孔質金属の表面特性

AUTHOR(S):

袴田, 昌高

---

CITATION:

袴田, 昌高. 多孔質金属の表面特性. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2013, 2012: 122-123

ISSUE DATE:

2013-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/173948>

RIGHT:

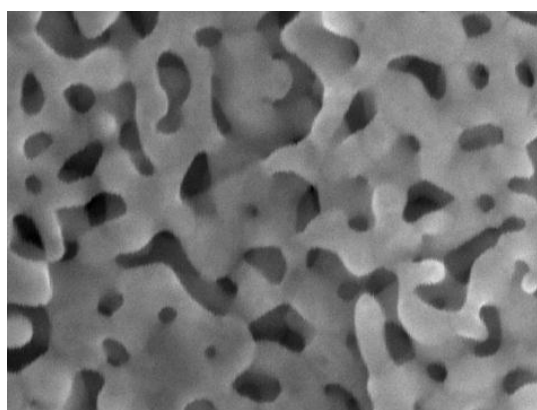
## 多孔質金属の表面特性

### Surface properties of porous metals

エネルギー科学研究科エネルギー応用科学専攻資源エネルギープロセス学 袴田 昌高

#### 背景と目的

脱合金化により作製される多孔質 Au (Fig. 1) の細孔内に酵素を固定して電極として用いると、電解液中での電位操作に対する電流の応答性が改善される (Fig. 2)。このメカニズムを考察するため、第一原理計算を用いて Au 表面の電子状態密度を計算した。



200 nm

Fig. 1 Scanning electron microscopic image of nanoporous Au with average pore size of 40 nm.

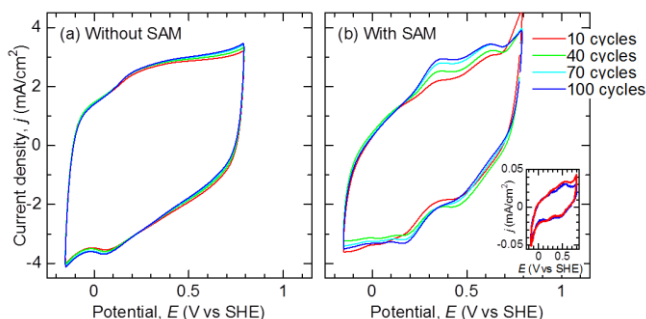


Fig. 2 Cyclic voltammetry curves for laccase-immobilized nanoporous Au (np-Au) working electrodes with (a) and without (b) a self-assembled monolayer (SAM) of 4-aminothiophenol. Inset in b shows CV curve for laccase-immobilized smooth surface of Au with the SAM.

#### 計算手法

計算コードは CASTEP を用いた。Au (111) 原子面を 5 層積層し、真空層 (厚さ 10 Å) に接する表面 3 層を緩和し、残りの下部 2 層の格子定数は固定した。k 点は 3×3×1 とし、カットオフエネルギーを 340 eV とした。最表面から Au 原子を適宜取り除くことで、多孔質 Au 表面の原子欠陥を再現した。

#### 結果および考察

Fig. 3 に各モデルの電子状態密度分布を示す。原子欠陥のない Au (111) 表面ではフェルミ順位近傍に複数のピークが見られる (Fig. 3a)。これは原子欠陥のない Au (111) 表面においては電子密度が異方化・局在化しており、電子の平均自由行程を短くする可能性があることを示す。一方、原子欠陥を導入した Au (111) 表面の電子状態密度はブロードであり (Figs. 3b & 3c)、原子欠陥の導入により電子の

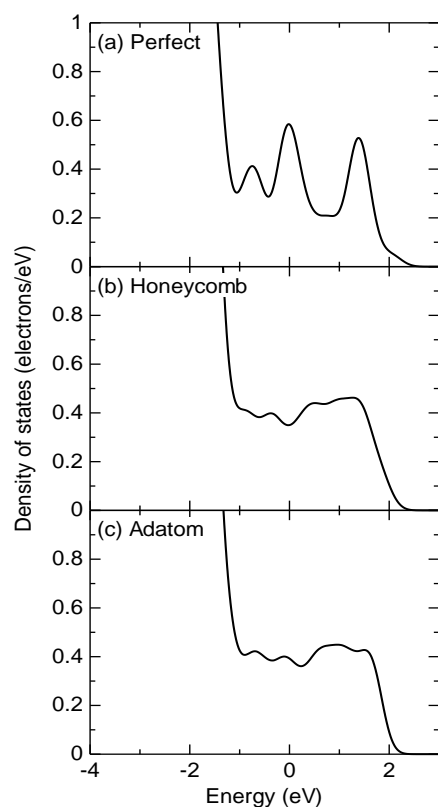


Fig. 3 Local density of states of (111) surface Au atom in (a) perfect, (b) honeycomb, and (c) adatom models calculated by first-principles calculations with CASTEP code. Fermi energy is set to 0 in the horizontal axes.

平均自由平均自由行程が長くなることが推測される。  
 このように、多孔質 Au の表面の原子欠陥は表面における電子移動の自由度を増し、電子授受に有利であることが推測される。

#### 発表論文

なし

#### 参考論文

なし